

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
ESCOLA DE ENGENHARIA  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA  
TRABALHO DE DIPLOMAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

**UM PRIMEIRO ESTUDO DO ESCOAMENTO BICAMADA DE POLÍMEROS  
VISCOELÁSTICOS COM O *SOLVER VISCOELASTICINTERFOAM***

Rodrigo Silveira da Silveira  
129622

Orientador:  
Prof. Nilo Sérgio Medeiros Cardozo, D. Sc.

Porto Alegre, RS  
Dezembro/2010

**Um primeiro estudo do escoamento bicamada de polímeros viscoelásticos com o *solver viscoelasticInterFoam***

*Rodrigo Silveira da Silveira*

Esta monografia foi apresentada no contexto da disciplina  
**ENG 07056: Trabalho de Diplomação em Engenharia Química**  
como requisito parcial para obtenção do título de  
**Engenheiro de Químico**

Porto Alegre, RS  
Dezembro/2010

## **Agradecimentos**

Agradeço à Universidade Federal do Rio Grande do Sul pelo ensino de qualidade, a meus professores, a meus amigos, a minha família, a meu orientador Nilo Sérgio Medeiros Cardozo e ao grupo de Tecnologia e Processamento de Polímeros do DEQUI.

# Sumário

Agradecimentos .....	ii
Lista de Figuras.....	v
Lista de Códigos .....	vii
Lista de Símbolos.....	viii
Lista de abreviaturas e siglas .....	x
Resumo.....	xi
Capítulo 1: Introdução .....	1
1.1: Contexto e motivação do trabalho .....	1
1.2: Objetivo.....	2
Capítulo 2: Conceitos e revisão bibliográfica .....	3
2.1: Parâmetros reológicos importantes para co-extrusão .....	3
2.2: Equações constitutivas .....	6
2.2.1: Conceitos e tipos.....	6
2.2.2: Equações constitutivas com potencial de utilização na co-extrusão.....	6
2.3: Modelagem e simulação da co-extrusão .....	10
2.3.1: Sistema de equações governantes .....	11
2.3.2: Método dos volumes finitos .....	12
2.3.3: Método Volume de Fluido ou VOF ( <i>volume of fluid</i> ) .....	13
2.3.4: Problemas inerentes à co-extrusão.....	14
2.4: Apresentação do <i>software OpenFoam</i> e do <i>solver viscoelasticInterFoam</i> .....	15
Capítulo 3: Metodologia .....	18
3.1: Implementação do caso de estudo no <i>viscoelasticInterFoam</i> .....	18
3.1.1: Estrutura de um caso no <i>viscoelasticInterFoam</i> .....	18
3.1.2: Geração de uma malha no <i>openFoam</i> .....	21
3.2: Parâmetros reológicos.....	24

Capítulo 4: Resultados e discussão .....	25
4.1: Aspecto dinâmico do escoamento .....	25
4.2: Análise da distribuição de velocidades .....	25
4.3: Análise das componentes das tensões.....	27
4.4: Instabilidade interfacial e efeitos ligados à viscoelasticidade.....	29
Capítulo 5: Conclusões e perspectivas.....	32
Bibliografia.....	33

## Lista de Figuras

Figura 2-1: Viscosidade não-newtoniana do PEBD como função da taxa de deformação em diversas temperaturas .....	4
Figura 2-2 : Classificação esquemática de escoamentos. ....	7
Figura 2-3: Fotografia de uma co-extrusora de distribuição de multicamadas .....	11
Figura 2-4 : Estrutura de diretórios de um caso no <i>openFoam</i> .....	16
Figura 3-1 : Estrutura de diretórios de um caso simulado com <i>viscoelasticInterFoam</i> .....	18
Figura 3-2 : Malha utilizada nas simulações e detalhe da zona de confluência dos fluidos.....	23
Figura 4-1 : Evolução da distribuição dos fluidos. ....	26
Figura 4-2 : Distribuição de velocidades para simulações: (a) malha A e (b) malha D. ....	27
Figura 4-3 : Componentes das tensões (a) $\tau_{xx}$ e (b) $\tau_{xy}$ para malha B. ....	28
Figura 4-4 : Evolução da componente $\tau_{xy}$ para malha C. ....	28
Figura 4-5 : Distribuição dos fluidos para diferentes simulações : (a) malha A, entrada paralela : Dow Styron <sup>TM</sup> 472 ( $\alpha=0,1$ ), entrada lateral : Dow Styron <sup>TM</sup> 678E ( $\alpha =0,1$ ) ; (b) malha E, entrada paralela : Dow Styron <sup>TM</sup> 472 ( $\alpha=0,1$ ), entrada lateral : Dow Styron <sup>TM</sup> 678E ( $\alpha =0,1$ ) ; (c) malha A, entrada paralela : Dow Styron <sup>TM</sup> 472 ( $\alpha=0,4$ ), entrada lateral : Dow Styron <sup>TM</sup> 678E ( $\alpha =0,1$ ) ; (d) malha E, entrada paralela : Dow Styron <sup>TM</sup> 472 ( $\alpha=0,4$ ), entrada lateral : Dow Styron <sup>TM</sup> 678E ( $\alpha =0,1$ ). ....	30

## **Lista de Tabelas**

Tabela 3-1 : Parâmetros das diferentes malhas utilizadas.....	23
Tabela 3-2 : Parâmetros reológicos do modelo de Giesekus.....	24

## Lista de Códigos

Código 3-1 : Declaração da variável fração de fluido (C) no <i>openFoam</i> .....	19
Código 3-2 : Código do <i>viscoelasticProperties</i> .....	20
Código 3-3 : Código do arquivo <i>blockMesh</i> .....	21

## Lista de Símbolos

$\mu$	<i>Viscosidade Newtoniana</i>
$\dot{\gamma}$	<i>Taxa de deformação</i>
$\eta(\dot{\gamma})$	<i>Viscosidade não – newtoniana</i>
$\eta_0$	<i>Viscosidade polimérica à taxa de deformação nula</i>
$\tau_{xx} - \tau_{yy}$	<i>Primeira diferença de tensões normais</i>
$\tau_{yy} - \tau_{zz}$	<i>Segunda diferença de tensões normais</i>
$\Psi_1$	<i>Primeiro coeficiente da diferença tensões normais</i>
$\Psi_2$	<i>Segundo coeficiente da diferença tensões normais</i>
$\bar{\eta}$	<i>Viscosidade elongacional</i>
$\dot{\epsilon}$	<i>Taxa de alongação</i>
$b$	<i>Parâmetro definidor do tipo de escoamento</i>
$\tau_p$	<i>Tensor das tensões poliméricas</i>
$tr(\tau_p)$	<i>Traço do tensor das tensões poliméricas</i>
$D$	<i>Tensor da taxa de deformação</i>
■ $\tau_p$	<i>Derivada de convectiva de Gordon – Schowalter</i>
$\epsilon, \xi$	<i>Parâmetro do modelo Phan – Thien Tanner</i>
$\lambda$	<i>Tempo de relaxação</i>
$\alpha$	<i>Parâmetro do modelo Giesekus</i>
$\nabla$	<i>Operador vetorial gradiente</i>
$\underline{v}$	<i>Vetor velocidade</i>
$\rho$	<i>Massa específica</i>
$p$	<i>Pressão</i>

$\underline{\underline{\tau}}$	<i>Tensor das tensões totais</i>
$C$	<i>Fração de fluido</i>

## Lista de abreviaturas e siglas

PEBD	Polietileno de Baixa Densidade
PTT	Phan-Thien Tanner
VOF	<i>Volume of Fluid</i>
DEVSS	<i>Discrete Elastic Viscous Split-Stress</i>
TNSD	<i>Total Normal Stress Difference</i>
DE	<i>Degree of Encapsulation</i>

## Resumo

Esse trabalho apresenta a implementação de uma metodologia de simulação da co-extrusão de polímeros viscoelásticos utilizando o *solver viscoelasticInterFoam* desenvolvido a partir do *software* livre *openFoam*. Para a modelagem do comportamento viscoelástico dos materiais foi utilizado o modelo Giesekus com parâmetros reológicos retirados da literatura. Foi realizada a variação da razão entre as espessuras das camadas de polímeros co-extrusados com o objetivo de observar o aparecimento de instabilidades interfaciais. As distribuições de velocidades, a distribuição dos materiais no domínio e as componentes das tensões no estado estacionário foram analisadas qualitativamente a fim de verificar se as simulações reproduziam o comportamento esperado para esse tipo de escoamento. Concluiu-se que a metodologia empregada produz resultados realistas, revelando que seria interessante a realização de trabalhos futuros nos quais se possa empregar uma análise quantitativa mais apurada, que possibilite a validação das simulações da co-extrusão com esse *solver*.

# Capítulo 1: Introdução

## 1.1: Contexto e motivação do trabalho

No Brasil, o desenvolvimento da indústria petroquímica de terceira geração foi bastante tardio e ainda não se observa uma parceria maciça com os outros segmentos. A inovação tecnológica ainda não é comum nesse setor, formado majoritariamente por pequenas e médias empresas que carecem de grandes recursos para investimentos em tecnologia. Nossa indústria de processamento de polímeros ainda opera essencialmente sob o licenciamento de tecnologia estrangeira (CERQUEIRA & HEMAIS, 2001). Dessa forma, a realização de trabalhos que possibilitem o barateamento dos investimentos em inovação no processamento desses materiais apresenta grande interesse.

Essas empresas produzem três classes de produtos distintos (HEMAIS, 2003) : *commodities*, *quasi-commodities* e polímeros de alto desempenho, esses últimos de maior valor agregado. Inovações tecnológicas a nível de processamento podem fazer com que um polímero de tipo *commodity*, de baixo valor agregado, possa adquirir novas propriedades e, conseqüentemente, ser utilizado com um fim bastante específico e de maior valor agregado. Esse é o caso da co-extrusão de polímeros. Com essa técnica, dois ou mais polímeros são extrusados de uma mesma vez numa mesma extrusora e o produto final combinará as propriedades dos diferentes materiais.

Em vista disto, o estudo da aprimoração dessa e outras técnicas de processamento de polímeros caracteriza-se como uma maneira eficaz de agregar valor à cadeia petroquímica. Contudo, os custos desse tipo de investimento devem tornar-se menos proibitivos para empresas de pequeno e médio porte, perfil característico das empresas do setor de plásticos.

Neste contexto, o grupo Tecnologia e Processamento de Polímeros, do DEQUI, vem investindo no desenvolvimento de ferramentas computacionais para utilização na modelagem e simulação de escoamentos viscoelásticos, as quais constituem uma base fundamental para o estudo e desenvolvimento de operações de processamento de polímeros típicas da indústria petroquímica de terceira geração. Entre essas ferramentas, destacam-se os *solvers viscoelasticFluidFoam* (FAVERO, 2009) e *viscoelasticInterFoam* (FAVERO, CARDOZO, SECCHI, & JASAK, 2010), implementados no *software* livre *OpenFoam*. O *viscoelasticFluidFoam* possibilita a simulação de escoamentos internos de fluidos

viscoelásticos. O *viscoelasticInterFoam*, combinação de *viscoelasticFluidFoam* com um solver *InterFoam* já existente no *openFoam*, permite simular escoamentos bifásicos. Esse último já vem sendo testado para simular o escoamento de polímeros em escoamentos com superfícies livres, caracterizados pela presença de uma superfície de contato polímero/ar. Essas ferramentas, sendo devidamente validadas e metrizadas, poderão ser bastante úteis para propulsão da inovação tecnológica nas empresas que não podem despender de grandes somas para investimento em tecnologia. Isso porque não exige pagamento de licença para sua utilização e apresenta uma grande versatilidade para adaptação a casos específicos. Este estudo está inserido nessa linha de pesquisa, consistindo em uma das etapas de teste do *viscoelasticInterFoam*, no qual se analisa sua aplicabilidade na simulação do processamento de polímeros por co-extrusão.

## **1.2: Objetivo**

O objetivo deste trabalho é de realizar um primeiro estudo da potencialidade do solver *viscoelasticInterFoam* em simular o comportamento de escoamentos bicamadas de polímeros viscoelásticos, típicos de processos de co-extrusão. A simulação de duas fases viscoelásticas representa um maior esforço computacional. Por isso, é interessante verificar o desempenho de seus métodos numéricos para esse tipo de escoamento.

## Capítulo 2: Conceitos e revisão bibliográfica

### 2.1: Parâmetros reológicos importantes para co-extrusão

A descrição do comportamento de fluidos newtonianos quando submetidos a tensões de cisalhamento depende, basicamente, apenas de uma função material – a viscosidade. Essa propriedade define uma relação linear entre as tensões às quais o material é submetido e a taxa de deformação observada. Esse tipo de descrição puramente viscosa é aplicável apenas aos materiais de estrutura molecular simples, mais precisamente gases e moléculas com massa molar inferior a 1000 (BIRD, ARMSTRONG, & HASSAGER, 1987).

Num escoamento com cisalhamento puro, o comportamento de um fluido newtoniano poderá ser descrito pela equação abaixo:

$$\tau_{yx} = -\mu\dot{\gamma}_{yx} \quad 2-1$$

Nesse modelo, bastante simples, o parâmetro  $\mu$ , chamado viscosidade, é constante.

Porém, a observação do comportamento de fluidos mais complexos em diversos experimentos evidenciou que seria necessário desenvolver modelos mais apurados para descrever o comportamento de materiais como polímeros ou soluções concentradas de eletrólitos. Alguns materiais apresentam viscosidade variável com a tensão aplicada. Outros podem apresentar comportamento elástico associado ao seu comportamento viscoso, denominando-se, assim, material viscoelástico. Nesses casos, o modelo utilizado para sua descrição deverá ser completo e complexo o suficiente para descrever o comportamento de sua viscosidade frente às variações na taxa de deformação e os fenômenos não lineares ligados à sua elasticidade.

Para isso, são inseridas novas funções materiais ou parâmetros reológicos ao modelo, de acordo com o grau de complexidade que o autor do mesmo se propõe a atingir.

A primeira e mais importante função material definida para descrever um fluido polimérico é a viscosidade não-newtoniana, ligada à tensão de cisalhamento pela Equação 2-2:

$$\tau_{yx} = -\eta(\dot{\gamma})\dot{\gamma}_{yx}$$

2-2

O parâmetro  $\eta(\dot{\gamma})$  é a viscosidade não-newtoniana. Experimentalmente observa-se que a baixas taxas de deformação essa propriedade mantém-se constante, aproximando-se de um valor  $\eta_0$ , chamado viscosidade à taxa de deformação nula.

Na Figura 2-1, são apresentados os dados de viscosidade para o PEBD (polietileno de baixa densidade) em diferentes temperaturas como uma função da taxa de deformação.

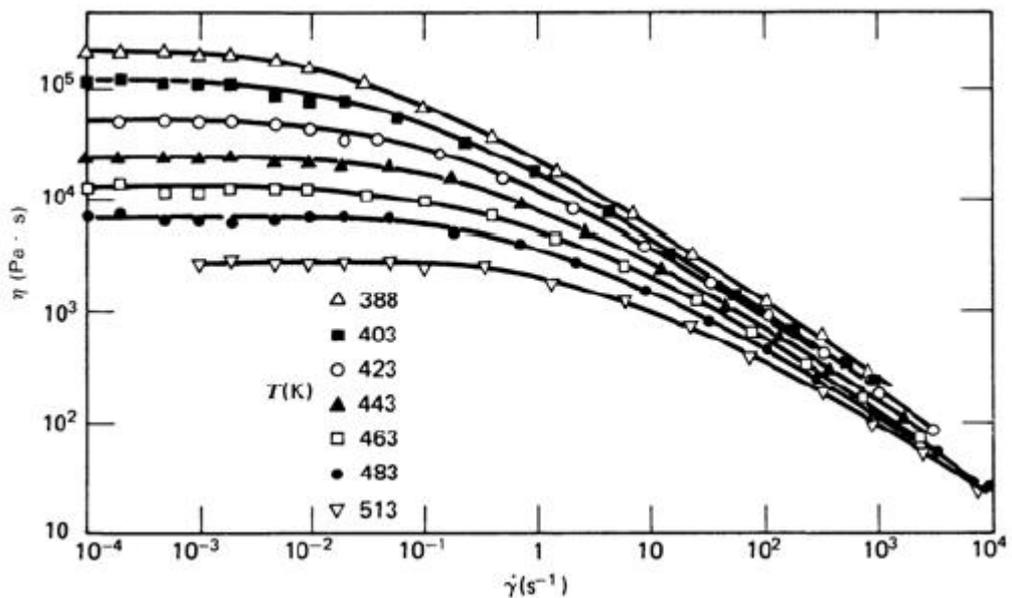


Figura 2-1: Viscosidade não-newtoniana do PEBD como função da taxa de deformação em diversas temperaturas (Fonte : BIRD, ARMSTRONG, & HASSAGER, 1987).

Em termos de aplicação em engenharia, essa é uma propriedade muito importante dos fluidos poliméricos, pois constitui a informação necessária para cálculos de queda de pressão e tempos característicos de escoamento em operações de processamento. Porém, ela não é suficiente para descrever os fenômenos elásticos e transientes observados no escoamento desses materiais, como, por exemplo, inchamento do polímero na saída de uma matriz de extrusão ou geração de tensão residuais devido à diferença de tensões normais.

Para os fluidos poliméricos, diferentemente dos fluidos newtonianos, as diferenças de tensões normais  $\tau_{xx} - \tau_{yy}$  e  $\tau_{yy} - \tau_{zz}$  não são nulas. Muito dos fenômenos viscoelásticos podem ser atribuídos a esse fato. Assim, podemos definir outros dois parâmetros  $\Psi_1$  e  $\Psi_2$ , primeiro e segundo coeficiente de tensões normais, através das relações:

$$\tau_{xx} - \tau_{yy} = -\Psi_1(\dot{\gamma})\dot{\gamma}_{yx}^2 \quad 2-3$$

$$\tau_{yy} - \tau_{zz} = -\Psi_2(\dot{\gamma})\dot{\gamma}_{yx}^2 \quad 2-4$$

A obtenção desses parâmetros possibilita caracterizar a grandeza das tensões normais às linhas de escoamento.

Para escoamentos livres de cisalhamento, têm-se que as diferenças de tensões normais estão relacionadas com a taxa de alongação pelas expressões abaixo, que definem as viscosidades  $\bar{\eta}_1$  e  $\bar{\eta}_2$ :

$$\tau_{zz} - \tau_{xx} = \bar{\eta}_1(\dot{\epsilon}, b)\dot{\epsilon} \quad 2-5$$

$$\tau_{yy} - \tau_{xx} = \bar{\eta}_2(\dot{\epsilon}, b)\dot{\epsilon} \quad 2-6$$

onde  $\dot{\epsilon}$  é a taxa de alongação e  $b$  parâmetro definidor do tipo de escoamento. Se o escoamento é em estado estacionário,  $b = 0$ ,  $\bar{\eta}_2 = 0$  e  $\bar{\eta}_1$  igual a viscosidade alongacional  $\bar{\eta}$ . Nos polímeros, a elevada viscosidade alongacional está associada aos efeitos de memória relacionados com a elasticidade (OLIVEIRA, 1996).

## **2.2: Equações constitutivas**

### **2.2.1: Conceitos e tipos**

Para que as equações da conservação da massa, energia e da quantidade de movimento para o escoamento de um material complexo possam ser resolvidas e, assim, seja possível obter o perfil de velocidades, queda de pressão, arraste e vazão volumétrica, é necessário o uso de uma equação que estabeleça uma relação matemática adequada entre as tensões às quais o material é submetido e sua taxa de deformação. A ferramenta matemática que define essa relação chama-se equação constitutiva mecânica do material.

No caso no qual o material em escoamento é um polímero, essa equação deve ser capaz de prever de que forma aspectos bastante complexos como efeitos da interação intra e intermolecular, efeitos de conformação, rigidez e vibração influenciam na maneira como o material escoar.

Dessa forma, de acordo com o grau de precisão necessário e também com o grau do desvio apresentado pelo material com relação ao comportamento do Newtoniano, o problema da simulação do material pode ser tratado em diferentes níveis de complexidade: nível atômico, microscópico e macroscópico. Analisando pela ótica do tratamento matemático, ainda podemos dividir as equações constitutivas em dois principais tipos: integral e diferencial. Na literatura é possível encontrar uma lista completa dos diferentes modelos propostos (MACOSKO, 1994; BIRD, ARMSTRANG & HASSAGER, 1987).

### **2.2.2: Equações constitutivas com potencial de utilização na co-extrusão**

Escoamentos complexos são aqueles nos quais o material é exposto a elevadas taxas de cisalhamento e alongação simultaneamente. Em escoamentos de cisalhamento puro, apenas as propriedades viscosas do material irão definir seu comportamento macroscópico. Em escoamentos alongacionais, os efeitos das propriedades elásticas do material estarão mais evidentes. A Figura 2-2 ilustra os escoamentos complexos como uma combinação dos dois tipos de deformação : cisalhante e alongacional (BAAIJENS, 1994).

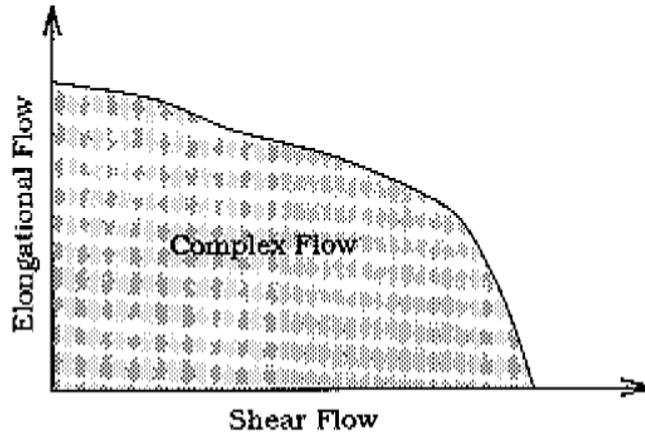


Figura 2-2 : Classificação esquemática de escoamentos. (Fonte : BAAIJENS, 1994).

A co-extrusão, que é a extrusão simultânea de duas ou mais camadas de polímeros – fluidos viscoelásticos – é um escoamento do tipo complexo. As chapas extrusadas geralmente são de espessura fina, caracterizando uma alta taxa de cisalhamento. Além disso, as zonas de confluência entre as camadas onde se formam zonas de estagnação dos fluidos, são caracterizadas por escoamentos predominantemente elongacionais (OLIVEIRA, 1996).

Além disso, as características geométricas da extrusora, com seus canais de alimentação, fazem com que modelos de alto desempenho devam ser utilizados para que a simulação reproduza o comportamento real do polímero. Assim, modelos viscoelásticos mais simples, como o modelo de Maxwell e Oldroyd B, que preveem viscosidade constante e diferença de tensões quadrática, não são adequados para simulação da coextrusão (OLIVEIRA, 1996).

Para reproduzir realisticamente o comportamento dos polímeros é necessário que o modelo preveja uma viscosidade variável com a taxa de deformação e que a expressão para a diferença de tensão normal seja eficaz mesmo a altas taxas de cisalhamento.

A literatura aponta os modelos Phan-Thien Tanner (PTT) e Giesekus como aqueles que apresentam os resultados mais adequados para modelar o comportamento viscoelástico nessas condições (OLIVEIRA, 1996).

O modelo PTT é bastante utilizado para simulação de fluidos viscoelásticos. Para um escoamento isotérmico, a equação constitutiva correspondente é descrita pela Equação 2-7:

$$f(\text{tr}(\tau_p))\tau_p + \lambda \overset{\blacksquare}{\tau_p} = 2\eta_p D \quad 2-7$$

onde  $\text{tr}(\tau_p)$  representa o traço do tensor das tensões poliméricas e  $D$  é o tensor da taxa de deformação. O modelo pode assumir as formas linear ou exponencial, dependendo da expressão da função  $f(\text{tr}(\tau_p))$ . As duas formas, que são expressões empíricas, são apresentadas pela Equação 2-8 :

$$f(\text{tr}(\tau_p)) = \begin{cases} 1 + \frac{\varepsilon\lambda}{\eta_p} \text{tr}(\tau_p) \\ \exp\left(\frac{\varepsilon\lambda}{\eta_p} \text{tr}(\tau_p)\right) \end{cases} \quad 2-8$$

$\overset{\blacksquare}{\tau_p}$  representa a derivada convectiva de Gordon-Schowalter, representada na Equação 2-9:

$$\overset{\blacksquare}{\tau_p} = \frac{D}{Dt} \tau_p - [\nabla v^T \cdot \tau_p] - [\tau_p \cdot \nabla v] + \xi (\tau_p \cdot D + D \cdot \tau_p) \quad 2-9$$

Os parâmetros envolvidos nesse modelo são:  $\lambda, \eta_p, \varepsilon$  e  $\xi$ . Os parâmetros  $\lambda$  e  $\eta_p$  são obtidos em ensaios reológicos adequados, correspondendo, respectivamente, ao tempo de relaxação e à viscosidade polimérica. Através de ensaios nos quais obtém-se os módulos de armazenamento e perda do material, chegamos a esses parâmetros (BIRD, ARMSTRONG, & HASSAGER, 1987).

Os parâmetros  $\varepsilon$  e  $\xi$  devem ser ajustados numericamente. Sabe-se que as funções materiais características de um escoamento com cisalhamento puro não são alteradas pela escolha de  $\varepsilon$ , enquanto que as funções materiais do escoamento elongacional não são sensíveis a  $\xi$ . No caso da utilização do modelo linear,  $\varepsilon$  limita superiormente a viscosidade elongacional. Seu valor é sempre positivo. O parâmetro  $\xi$  quantifica o deslize entre a cadeia molecular e o meio contínuo, assegurando que a segunda diferença de tensões normais não seja nula para esse modelo.

Como os parâmetros da equação constitutiva estão associados às características das moléculas do polímero e como os polímeros comerciais são geralmente polidispersos, ou seja,

apresentam uma distribuição de massas molares, muitas vezes faz-se necessário a utilização de modelos multi-modos. A forma multi-modo do modelo PTT é dada por:

$$f(\text{tr}(\tau_{p_K}))\tau_{p_K} + \lambda_K \frac{\nabla}{\tau_{p_K}} = 2\eta_{p_K}D \quad 2-10$$

onde o subíndice  $K$  indica os modos considerados para representação do comportamento da amostra polidispersa, sendo que o número total de parâmetros do modelo depende obviamente do número total de modos utilizados.

Uma dificuldade associada ao uso do modelo PTT é o grande número de parâmetros que devem ser determinados. Um número bastante grande de informações sobre o polímero deve estar disponível para que se consiga realizar o ajuste de maneira confiável.

Neste sentido uma alternativa é a utilização do modelo de Giesekus, apresentado na Equação 2-11:

$$\tau_{p_K} + \lambda_K \frac{\nabla}{\tau_{p_K}} + \alpha_K \frac{\lambda_K}{\eta_{p_K}} (\tau_{p_K} \cdot \tau_{p_K}) = 2\eta_{p_K}D \quad 2-11$$

onde os parâmetros  $\lambda$  e  $\eta_p$  tem o mesmo significado que no modelo PTT.

Esse modelo é baseado numa teoria que simplifica a molécula polimérica como esferas unidas por uma mola que obedece a lei de Hooke. Essa equação prevê, através de seu termo não-linear, a variação das propriedades viscosas com a taxa de deformação. O parâmetro ajustável  $\alpha$ , chamado de fator de mobilidade, está associado ao arraste hidrodinâmico anisotrópico das moléculas de polímero no meio (BIRD, ARMSTRONG, & HASSAGER, 1987). Para valores de  $\alpha$  no intervalo de ]0;1/2[ as simulações são mais coerentes fisicamente. Esse parâmetro garante que a segunda diferença de tensões normais não seja nula para o modelo.

## 2.3: Modelagem e simulação da co-extrusão

A co-extrusão é um processo no qual dois ou mais polímeros são processados simultaneamente numa mesma matriz com o objetivo de formar uma única estrutura estratificada (PARK, AHN, & LEE, 2001). O interesse no estudo desse processo vem do fato de que ele permite a obtenção de um produto final de alto desempenho e com propriedades bastantes específicas, a partir da utilização de materiais de custo relativamente baixo. Existem diferentes tipos de produtos de co-extrusão adequados para cada tipo de aplicação (SUNWOO *et al*, 2000):

- Fibras conjugadas: a indústria de fibras artificiais e de fibras sintéticas se utiliza de co-extrusoras com cavidades cilíndricas, que mesclam propriedades de fibras distintas.
- Tubos e encapamentos para fios: para obtenção desse tipo de produtos, os materiais devem ser co-extrusados através de cavidades anulares.
- Filmes multicamadas: a indústria alimentícia e de produção de isolantes para refrigeração obtém filmes co-extrusando polímeros distintos através de cavidades delgadas.

Nesse trabalho, será apenas estudada a co-extrusão de polímeros para obtenção de filmes delgados. Os equipamentos comercializados atualmente são basicamente de dois tipos: co-extrusoras do tipo bloco de co-extrusão (*feed block*) e do tipo distribuição por camadas múltiplas (*multi-manifold*) (OLIVEIRA, 1996). O primeiro combina todas as camadas antes que entrem na matriz, o segundo as distribui separadamente, combinando-as apenas na saída do equipamento.

As simulações realizadas nesse trabalho são baseadas na geometria de uma co-extrusora de distribuição de camadas múltiplas, segundo estudo realizado por MARTYN *et al* (2009). O equipamento utilizado nos experimentos desses pesquisadores é apresentado na Figura 2-3. O equipamento consiste em dois canais delgados, por onde os dois polímeros são extrusados, encontrando-se posteriormente para formação do filme estratificado.

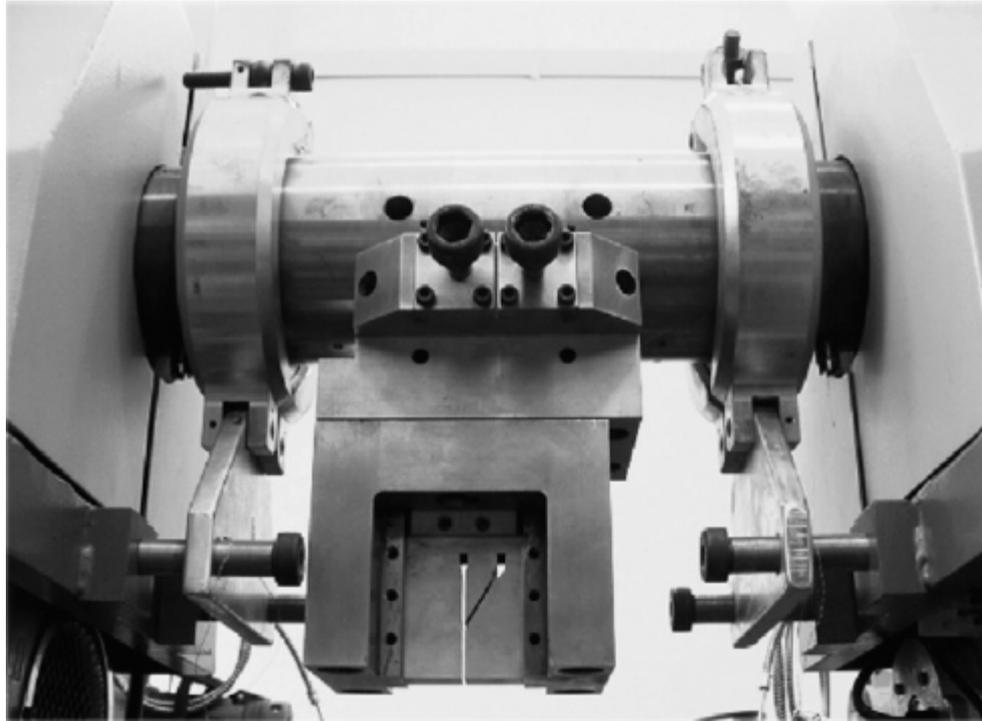


Figura 2-3: Fotografia de uma co-extrusora de distribuição de multicamadas (Fonte : MARTYN *et al*, 2009).

### **2.3.1: Sistema de equações governantes**

A simulação do comportamento de um fluido num determinado escoamento visa, principalmente, à obtenção do perfil de velocidades, da distribuição de pressão e, no caso de escoamento não-isotérmicos, à obtenção da distribuição de temperaturas no interior da massa fluida. A partir desse dados, é possível chegar a grandezas como tensões e queda de pressão, que possibilitarão dimensionar equipamentos e determinar as condições requeridas para operação.

A mecânica dos fluidos estabelece um sistema de equações completo para a modelagem do comportamento de fluidos em escoamento, baseado nos princípios de conservação de massa, de quantidade de movimento e de energia. Nas simulações que serão estudadas nesse trabalho, o problema será modelado como incompressível e isotérmico. Sabemos de antemão que o escoamento de polímeros dissipa quantidades consideráveis de energia por atrito, responsáveis por alterações importantes nas propriedades do material durante o processo. Porém, em vista das dificuldades inerentes à simulação de escoamentos de materiais viscoelásticos e, além disso, bifásicos, o problema será considerado isotérmico.

Abaixo são apresentadas, respectivamente, as Equações 2-12 e 2-13 correspondente às leis de conservação da massa e da quantidade de movimento, respectivamente, e que deverão ser resolvidas para obtenção das grandezas desejadas :

$$\underline{\nabla} \cdot \underline{v} \quad 2-12$$

$$\rho \left( \frac{\partial \underline{v}}{\partial t} + \underline{v} \cdot \underline{\nabla} \underline{v} \right) = -\underline{\nabla} p + \underline{\nabla} \cdot \underline{\tau} \quad 2-13$$

Nesse sistema temos que  $\rho$  é a massa específica do material,  $\underline{v}$  é o vetor velocidade,  $p$  é a pressão e  $\underline{\tau}$  é o tensor das tensões. Para materias poliméricos, o tensor das tensões pode ser decomposto como apresentado na Equação 2-14 :

$$\underline{\tau} = \underline{\tau}_N + \underline{\tau}_P \quad 2-14$$

onde  $\underline{\tau}_N$  é a contribuição newtoniana, geralmente atribuída ao comportamento do solvente no caso de uma solução polimérica (Equação 2-1), enquanto que  $\underline{\tau}_P$  é a equação escolhida para modelar o comportamento viscoelástico do material, neste trabalho descrito pelas Equações 2-7 e 2-10.

### 2.3.2: Método dos volumes finitos

Para resolver o sistema de equações representado pelas Equações 2-12, 2-13 e 2-7 ou 2-10 em situações práticas onde os escoamentos e os materiais são complexos e não se pode simplificar os termos não-lineares, deve-se aplicar alguma metodologia de discretização. Assim, o sistema discreto deverá ser resolvido computacionalmente.

Em mecânica dos fluidos, um dos métodos de discretização mais utilizado é o dos volumes finitos. Para empregá-lo, primeiramente realiza-se uma discretização do domínio, seguida da discretização das equações. O domínio no qual o problema será resolvido deve ser dividido em um número finito de regiões discretas, denominadas volumes de controle. Após isso, as equações diferenciais parciais que governam o problema são integradas nesses

volumes de controle, resultando num sistema de equações algébricas. A apresentação do procedimento de discretização completo foge do escopo desse trabalho. Para o leitor interessado, aconselha-se a leitura do trabalho de Jasak (1996).

### **2.3.3: Método Volume de Fluido ou VOF (*volume of fluid*)**

Para simular a co-extrusão, além de aplicar-se um esquema de discretização adequado, é necessário utilizar uma técnica que possibilite a determinação da interface entre os dois fluidos. O método Volume de Fluido, mais conhecido pela sua sigla em inglês VOF, é um método que aplica um esquema de tipo Euleriano para prever a posição da interface entre os fluidos num escoamento bifásico.

O método emprega uma nova propriedade para descrever o comportamento dinâmico do sistema bifásico, chamada fração de fluido e simbolizada pela letra C. Quando, em um dado volume de controle, essa função assume valor unitário, C=1, essa célula estará cheia de um dos polímeros (polímero A, por exemplo). No caso de seu valor ser nulo, C=0, o volume de controle estará completamente preenchido pelo polímero B. No caso de  $0 < C < 1$ , a interface entre os dois materiais estará passando através do volume de controle, no instante em questão (HIRT & NICHOLS, 1981).

A função C é uma função escalar e determina, de uma certa forma, a identidade de cada partícula em movimento. Sendo assim, como cada partícula deve, necessariamente, manter sua identidade ao longo do processo de escoamento, deve-se garantir isso através da adição de uma nova equação ao sistema que governa o processo : a derivada material da função C deverá ser igual à 0, isto é:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \underline{v} \cdot \underline{\nabla} C = 0 \quad 2-10$$

Esse método é considerado como um dos mais refinados, pois, diferentemente da maioria, ele possibilita um acompanhamento bastante realístico da deformação das superfícies das fases em contato. Porém, sabe-se que ele é bastante custoso computacionalmente (SILVA, 2008). Nesse trabalho esse método foi utilizado, pois ele é o método implementado no *OpenFOAM* para simulação de escoamentos bifásicos. Por outro lado, devido ao fato de que esse método não calcula a interface explicitamente, mas a determina como uma propriedade

resultante da média da fração de fluido que passa por aquele volume de controle (OpenFoam : The Open Source CFD Toolbox - User Guide, 2008), acredita-se que ele não seja tão preciso na determinação da exata posição da interface.

#### **2.3.4: Problemas inerentes à co-extrusão**

A característica peculiar da co-extrusão enquanto processo é a existência de uma interface de contato entre os polímeros em escoamento. A simulação da coextrusão visa a determinar essa interface e a estabelecer quais as variáveis de processo e propriedades dos materiais que afetam sua posição e formato. Estas variáveis definirão a espessura e a uniformidade de cada camada no produto final.

Alguns estudos experimentais e teóricos com polímeros permitiram constatar que a posição da interface é afetada pela viscosidade e a elasticidade dos materiais (PARK, AHN, & LEE, 2001). Para o escoamento bicamada de fluidos apenas viscosos, observa-se que o fluido menos viscoso encapsula o fluido mais viscoso. Esse fenômeno pode ser explicado pelo fato de que é mais vantajoso energeticamente para o sistema que o fluido menos viscoso escoar próximo à parede, pois assim a dissipação de energia por atrito será menor.

Para fluidos viscoelásticos, observa-se a mesma tendência. Porém, estudos experimentais e numéricos mais aprofundados revelam que a elasticidade do material também tem um papel crucial no fenômeno de encapsulamento (SUNWOO *et al*, 2002). Para o estudo numérico do encapsulamento, a simulação deve ser, necessariamente realizada em geometria tridimensional.

Outro fenômeno observado durante a coextrusão é a instabilidade interfacial, que afeta negativamente as propriedades físicas, mecânicas e óticas do produto final (MARTYN *et al*, 2009). Nesses casos, ondulações e irregularidades que surgem na interface fazem com que as camadas não sejam de mesma espessura ao longo de toda a chapa. Muitas vezes, uma das camadas pode penetrar na outra, atingindo a superfície oposta. Se uma das camadas torna-se muito delgada, seu efeito sobre o produto final não será observado.

## 2.4: Apresentação do *software OpenFoam* e do *solver viscoelasticInterFoam*

O *openFoam*, *software* utilizado nas simulações deste trabalho, é um *software* livre criado em 1993 por Henry Weller e Hrvoje Jasak. Foi desenvolvido, principalmente, como uma ferramenta para possibilitar operações com campos tensoriais (FAVERO, 2009). Sendo um *software* de código aberto, é bastante flexível para implementação de novas simulações e é escrito em linguagem C++.

Ao simulador nível usuário, o *openFoam* disponibiliza:

- Uma estruturação em um conjunto de arquivos onde ficam armazenados as informações de pré e pós-processamento da nova implementação. Cada caso se apresenta sob a estrutura de diretórios apresentada Figura 2-4. Nessa estrutura, o diretório principal é *<case>*, a raiz do caso onde ficam armazenadas todos os outros arquivos. Em *time directories* ficam os arquivos individuais das variáveis tratadas na simulação. Em *system* são armazenados *controlDict*, *fvSolution* e *fvSchemes* que descrevem o procedimento de solução empregado no caso. Em *constant* estão descritas as propriedades físicas pertinentes e a geometria do sistema.
- Um criador de malhas e visualizador incorporado. As informações devem ser armazenadas no arquivo *blockMeshDict* na etapa de pré-processamento e a malha é gerada através do comando *blockMesh*.
- Possibilidade de importação e exportação de dados.
- Ampla faixa de aplicações : aerodinâmica, hidrodinâmica de fluidos newtonianos e não-newtonianos, sistemas multifásicos, sistemas com e sem reação química entre outros.

Por outro lado, para o simulador nível programador, ele oferece um código flexível escrito em linguagem orientada a objeto bastante versátil. Dessa forma, um usuário com sólidos conhecimentos de linguagem C++ está apto a desenvolver seu próprio *solver* adaptado a sua aplicação específica. O caso do *solver* utilizado para a realização desse estudo, o *viscoelasticInterFoam*, ilustra essa flexibilidade. Ele é um *solver* que simula o escoamento bifásico originado a partir de outros dois outros *solvers* baseados no *openFoam* : *interFoam* e *viscoelasticFluidFoam*.

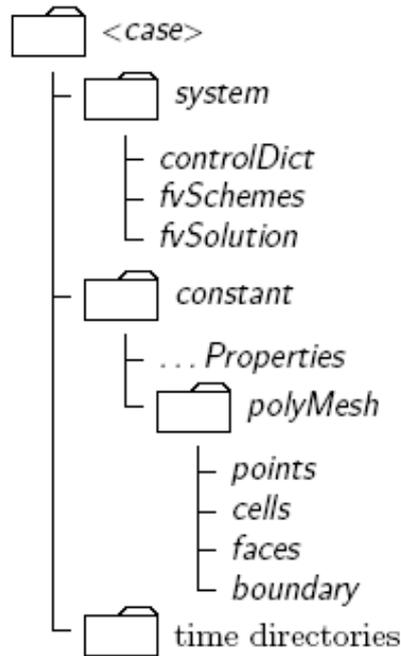


Figura 2-4 : Estrutura de diretórios de um caso no *openFoam* (Fonte : OpenFoam : The Open Source CFD Toolbox - User Guide, 2008).

O *solver interFoam* possibilita a simulação do escoamento bifásico de fluidos separados por uma interface livre. O método usado para equacionar a dinâmica bifásica é o Volume de Fluido, já discutido na Seção 2.3.3. Porém, esse *solver* se limita a descrever fluidos compressíveis e líquidos newtonianos.

Favero (2009) desenvolveu o *solver viscoelasticFluidFoam* que possibilita a simulação do comportamento de fluidos poliméricos viscoelásticos segundo uma vasta gama de modelos encontrados na literatura. Seu algoritmo é baseado no método dos volumes finitos, com metodologia DEVSS (*Discrete Elastic Viscous Split-Stress*) (FAVERO, 2009) aplicada à discretização da equação da quantidade de movimento. Esse *solver* já teve seu desempenho testado para alguns escoamentos e continua sendo estudado em novos trabalhos, a fim de ter sua aplicabilidade comprovada.

O *solver viscoelasticInterFoam* elaborado por Favero (2009) é uma combinação dos dois discutidos acima e está sendo testado em trabalhos que simulam o preenchimento de cavidades com polímeros (FAVERO *et al*, 2010). Nesse tipo de simulação, apenas uma das fases é um material viscoelástico, enquanto a outra é um fluido compressível, o ar, que se

desloca para fora da cavidade à medida que ela é preenchida pelo polímero. Sua aplicabilidade ainda não foi testada para simular escoamento de duas fases viscoelásticas.

## Capítulo 3: Metodologia

### 3.1: Implementação do caso de estudo no *viscoelasticInterFoam*

#### 3.1.1: Estrutura de um caso no *viscoelasticInterFoam*

A estrutura básica de diretórios do OpenFOAM, apresentada na Figura 2-4, pode ser particularizada segundo as necessidades do *solver* que está sendo utilizado. Para um caso a ser simulado com *viscoelasticInterFoam* a estrutura é apresentada na Figura 3-1.

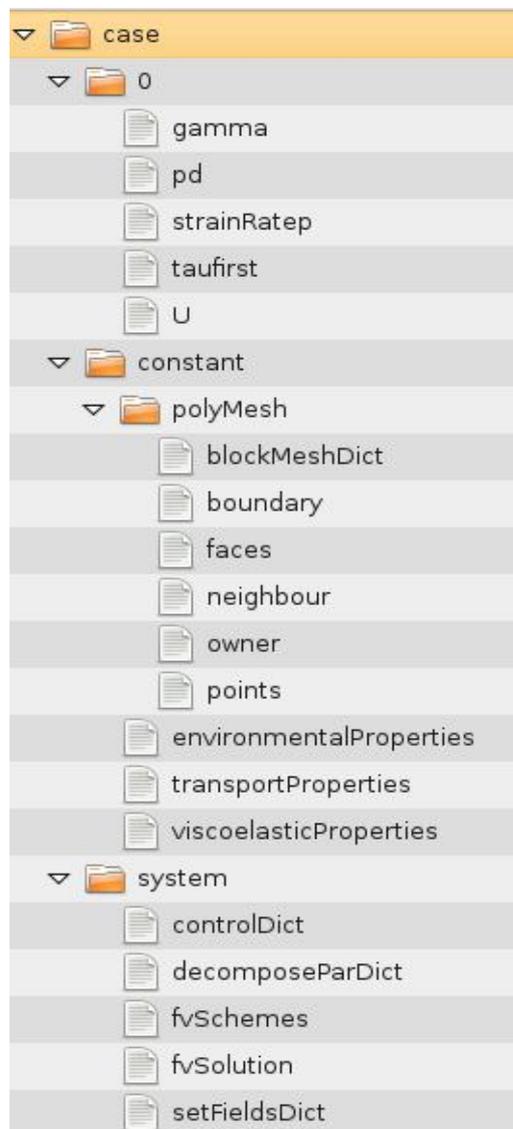


Figura 3-1 : Estrutura de diretórios de um caso simulado com *viscoelasticInterFoam*.

Na etapa de pré-processamento, o único *time directory* é o diretório “0”, onde ficam armazenadas as condições iniciais das variáveis de interesse ao problema. À medida que a simulação é disparada, de acordo com o passo estipulado, vão surgindo novos diretórios com os valores atualizados das variáveis a cada instante.

Para ilustrar como se estrutura um diretório de declaração de variáveis no *openFoam*, será apresentado a seguir o arquivo correspondente à variável fração de fluido (C) do método Volume de Fluido descrito na Seção 2.3.3 , chamado de *gamma* no *openFoam*.

Código 3-1 : Declaração da variável fração de fluido (C) no *openFoam*.

```
// * * * * *
* //

dimensions      [0 0 0 0 0 0 0];

internalField   uniform 0;

boundaryField
{
    inletFluid1
    {
        type          fixedValue;
        value         uniform 1;
    }
    inletFluid2
    {
        type          fixedValue;
        value         uniform 0;
    }
    outlet
    {
        type          zeroGradient;
    }
    inletWallFluid1
    {
        type          zeroGradient;
    }
    inletWallFluid2
    {
        type          zeroGradient;
    }
    frontAndBack
    {
        type          empty;
    }
}
//
*****
//
```

No Código 3-1, a primeira linha (comando *dimensions*) corresponde à declaração das unidades da variável. Como a variável fração de fluido (*C*) é adimensional, sua dimensão é vazia. No escoamento bifásico estudado, o fluido 1 corresponde à região de *C* igual a 1 e o fluido 2 a *C* nulo. No tempo zero, como pode ser visto acima, o interior do domínio é inicializado preenchido do fluido 2, como é declarado no comando *internalField*. Depois disso são declarados os valores iniciais da variável nos contornos do sistema. Na entrada *inletFluid1* fixou-se um unitário de *C* e na entrada *inletFluid2* foi fixado um valor nulo *C*. As demais interfaces do contorno do sistema serão explicadas na Seção 3.1.2.

Outro arquivo a ser apresentado é o *viscoelasticProperties*, onde são declaradas as propriedades reológicas dos fluidos. No Código 3-2, são declarados os parâmetros do modelo Giesekus (Seção 2.2.2) das duas fases poliméricas. Da mesma forma indicada anteriormente, a unidade dos parâmetros deve ser declarada no vetor entre colchetes, seguido da sua magnitude.

Código 3-2 : Código do *viscoelasticProperties*.

```
// * * * * *
* //
rheology
{
    type multiMode;

    models
    (
        first
        {
            type Giesekus;

            phase1
            {
                etaS      etaS [1 -1 -1 0 0 0 0] 26.4;
                etaP      etaP [1 -1 -1 0 0 0 0] 527.8;
                lambda    lambda [0 0 1 0 0 0 0] 0.010;
                alpha     alpha [0 0 0 0 0 0 0] 0.4;
            }
            phase2
            {
                etaS      etaS [1 -1 -1 0 0 0 0] 48.4;
                etaP      etaP [1 -1 -1 0 0 0 0] 1383.1;
                lambda    lambda [0 0 1 0 0 0 0] 0.020;
                alpha     alpha [0 0 0 0 0 0 0] 0.4;
            }
        }
    );
}
//
*****
//
```

### 3.1.2: Geração de uma malha no *openFoam*

Os arquivos necessários para geração da malha no *openFoam* estão contidos no sub-diretório *polyMesh*. O arquivo *blockMeshDict* contém os comandos necessários para definição dos pontos, das células e das faces da malha, como mostra o Código 3-3.

Código 3-3 : Código do arquivo *blockMesh*.

```
// * * * * *
* //

convertToMeters 0.001;
vertices
(
(-21.054 12.5 0)
(-20.454 12.5 0)
(-13.536 8.5 0)
(-14.136 8.5 0)
(-6.618 4.5 0)
(-7.218 4.5 0)
(0.3 0.5 0)
(-0.3 0.5 0)
(0.3 -0.5 0)
(-0.3 -0.5 0)
(40.5 0.5 0)
(40.5 -0.5 0)
(-24.5 0.5 0)
(-24.5 -0.5 0)
(-21.054 12.5 25)
(-20.454 12.5 25)
(-13.536 8.5 25)
(-14.136 8.5 25)
(-6.618 4.5 25)
(-7.218 4.5 25)
(0.3 0.5 25)
(-0.3 0.5 25)
(0.3 -0.5 25)
(-0.3 -0.5 25)
(40.5 0.5 25)
(40.5 -0.5 25)
(-24.5 0.5 25)
(-24.5 -0.5 25)
);
blocks
(
hex (3 2 1 0 17 16 15 14) (12 5 1) simpleGrading (1 1 1)
hex (5 4 2 3 19 18 16 17) (12 5 1) simpleGrading (1 1 1)
hex (7 6 4 5 21 20 18 19) (12 60 1) simpleGrading (1 1 1)
hex (9 8 6 7 23 22 20 21) (12 100 1) simpleGrading (1 1 1)
hex (8 11 10 6 22 25 24 20) (100 100 1) simpleGrading (10 1 1)
hex (13 9 7 12 27 23 21 26) (200 100 1) simpleGrading (1 1 1)
);
edges
```

```

(
);
patches
(
patch inletFluid1
(
(0 1 15 14)
)
patch inletFluid2
(
(12 13 27 26)
)
patch outlet
(
(10 11 25 24)
)
wall inletWallFluid1
(
(0 3 17 14)
(3 5 19 17)
(5 7 21 19)
(1 2 16 15)
(2 4 18 16)
(4 6 20 18)
)
wall inletWallFluid2
(
(12 7 21 26)
(6 10 24 20)
(9 13 27 23)
(8 9 23 22)
(11 8 22 25)
)
empty frontAndBack
(
(0 1 2 3)
(3 2 4 5)
(4 6 7 5)
(6 10 11 8)
(6 8 9 7)
(7 9 13 12)
(14 15 16 17)
(17 16 18 19)
(19 18 20 21)
(20 24 25 22)
(20 22 23 21)
(21 23 27 26)
)
);
mergePatchPairs
(
);

//
*****
//

```

Primeiro são definidos os vértices da geometria após o comando *vertices*, seguidos dos blocos após o comando *blocks*, que consistem em hexaedros que compõem o domínio.

Logo após o comando *patches* são definidos os contornos do sistema. Para o problema simulado, foram definidos 6 *patches*: as entradas *inletFluid1* e *inletFluid2*, a saída *outlet*, e as paredes *inletwallFluid1* e *inletwallFluid2*. Esses *patches* correspondem às paredes do domínio nas quais as condições de contorno serão definidas. A linha de comando *empty frontAndBack* define que o problema será simulado em duas dimensões.

As malhas resultantes e seus parâmetros são apresentados na Figura 3-2 e na Tabela 3-1, respectivamente.

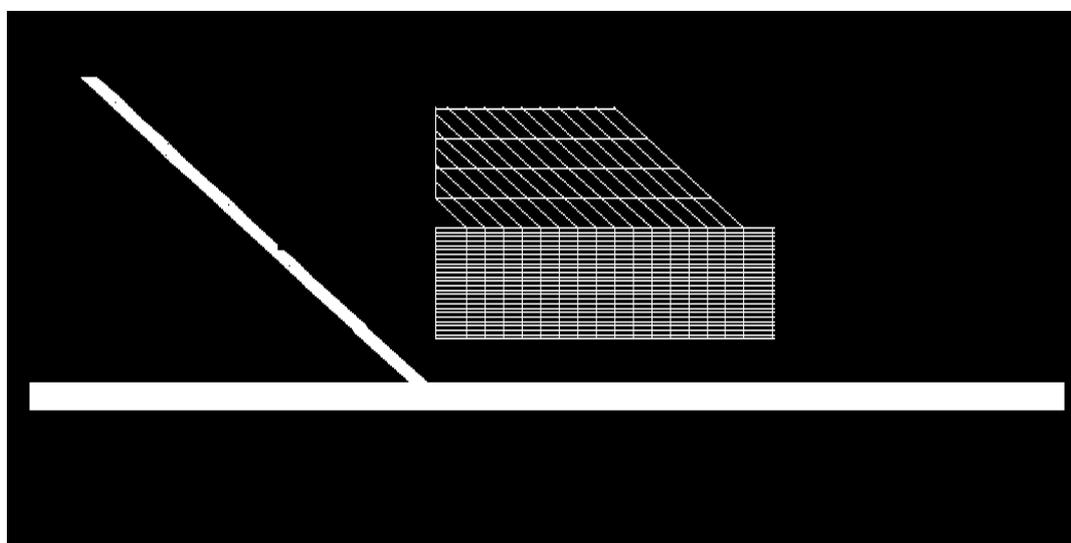


Figura 3-2 : Malha utilizada nas simulações e detalhe da zona de confluência dos fluidos.

Tabela 3-1 : Parâmetros das diferentes malhas utilizadas.

Malha	Relação E2/E1*	Número de volumes de controle
A	1	32550
B	0,8	32550
C	0,7	32040
D	0,6	32040
E	0,5	31700

\* Razão entre a espessura da entrada lateral (E2) e da entrada paralela (E1).

Como pode-se analisar no detalhe da Figura 3-2, foi realizado um refinamento na malha na zona de confluência entre os fluidos e na zona à jusante dessa posição. A malha tenta reproduzir a configuração do canal de co-extrusão mostrado na Figura 2-3.

A espessura da entrada paralela ao escoamento principal, para todas as malhas listadas na Tabela 3-1 é de 1 mm. A espessura da entrada paralela varia segundo indicado na mesma tabela. O comprimento do canal após a região de confluência dos fluidos é de 40 mm, o ângulo entre as entradas é de 30°. Esses parâmetros estão de acordo com a geometria real da co-extrusora apresentada na Figura 2-3.

### 3.2: Parâmetros reológicos

Na Seção 2.2.2 foram listados os diferentes modelos com potencial uso na simulação da co-extrusão. Porém, devido à falta de tempo, foram realizadas simulações utilizando apenas o modelo de Giesekus. Os parâmetros usados são apresentados na Tabela 3-2 e foram retirados da literatura, correspondendo a *grades* de poliestireno utilizados comercialmente para co-extrusão. Esses parâmetros foram ajustados por Sunwoo *et al.* (2002) a partir dos dados experimentais publicado por Karagiannis *et al.* (1990) *apud* Sunwoo *et al.* (2002) para os polímeros : Dow Styron™ 472 e 678E. A massa específica de ambos materiais é de 997 kg/m<sup>3</sup> (KARAGIANNIS *et al.*, 1990 *apud* Sunwoo *et al.*, 2000).

Tabela 3-2 : Parâmetros reológicos do modelo de Giesekus (Fonte : SUNWOO *et al.*, 2002).

Material	Parâmetro	$\alpha = 0,1$	$\alpha = 0,4$
Dow Styron™ 472	$\eta_s (Pa \cdot s)$	51,4	48,4
	$\eta_p (Pa \cdot s)$	1398,3	1383,1
	$\lambda_1 (s)$	0,043	0,020
Dow Styron™ 678E	$\eta_s (Pa \cdot s)$	22,0	26,4
	$\eta_p (Pa \cdot s)$	536,0	527,8
	$\lambda_1 (s)$	0,019	0,010

## Capítulo 4: Resultados e discussão

### 4.1: Aspecto dinâmico do escoamento

Na Figura 4-1 é apresentada a distribuição dos dois fluidos para os tempos 5, 15, 25s e para o estado estacionário da simulação com malha de tipo A. O fluido da entrada paralela é o fluido de propriedades reológicas correspondentes às do material Dow Styron™ 472 ( $\alpha=0,1$ ) e o da entrada lateral é o Dow Styron™ 678E ( $\alpha=0,1$ ). Devido à necessidade de se inicializar a variável fração de fluido (C) em todo domínio, optou-se por escolher a seguinte configuração inicial:

- O fluido de entrada lateral preenche todo domínio com velocidade nula.
- Nos contornos *inletFluid1* e *inletFluid2*, foram fixados valores de  $C=1$  e  $C=0$  respectivamente e, além disso, vetores velocidade como  $v = (0,00896 \ 0 \ 0)$  m/s e  $v = (-0,000776 \ -0,000448 \ 0)$  m/s a fim de reproduzir condições usadas na literatura (MARTYN *et al*, 2009).

A configuração do estado estacionário reproduziu uma distribuição de camadas realista. Na literatura existem estudos com diferentes tipos de condições iniciais e de contorno (PARK, AHN & LEE, 2001; SUNWOO *et al*, 2002). As que são mais utilizadas são a imposição de um perfil completamente desenvolvido na entrada e uma condição de tipo gradiente nulo na saída. Devido à dificuldade de imposição de um perfil completamente desenvolvido para a entrada no *openFoam*, decidiu-se, nesse estudo inicial da co-extrusão nesse *software*, impor-se uma velocidade constante na entrada. Acredita-se que com uma malha com um canal de entrada suficientemente longo antes da zona de confluência dos fluidos, os efeitos dessa escolha sejam minimizados.

### 4.2: Análise da distribuição de velocidades

Na Figura 4-2 é possível observar a distribuição de velocidades para as simulações com as malhas A e C. Esta distribuição é semelhante ao reportado por outros autores na literatura (MARTYN *et al*, 2009) e está de acordo ao esperado do ponto de vista teórico, pois os valores mais elevados para a magnitude da velocidade são encontrados para a região à jusante da zona de confluência (MARTYN *et al*, 2009). Além disso, pode-se observar que

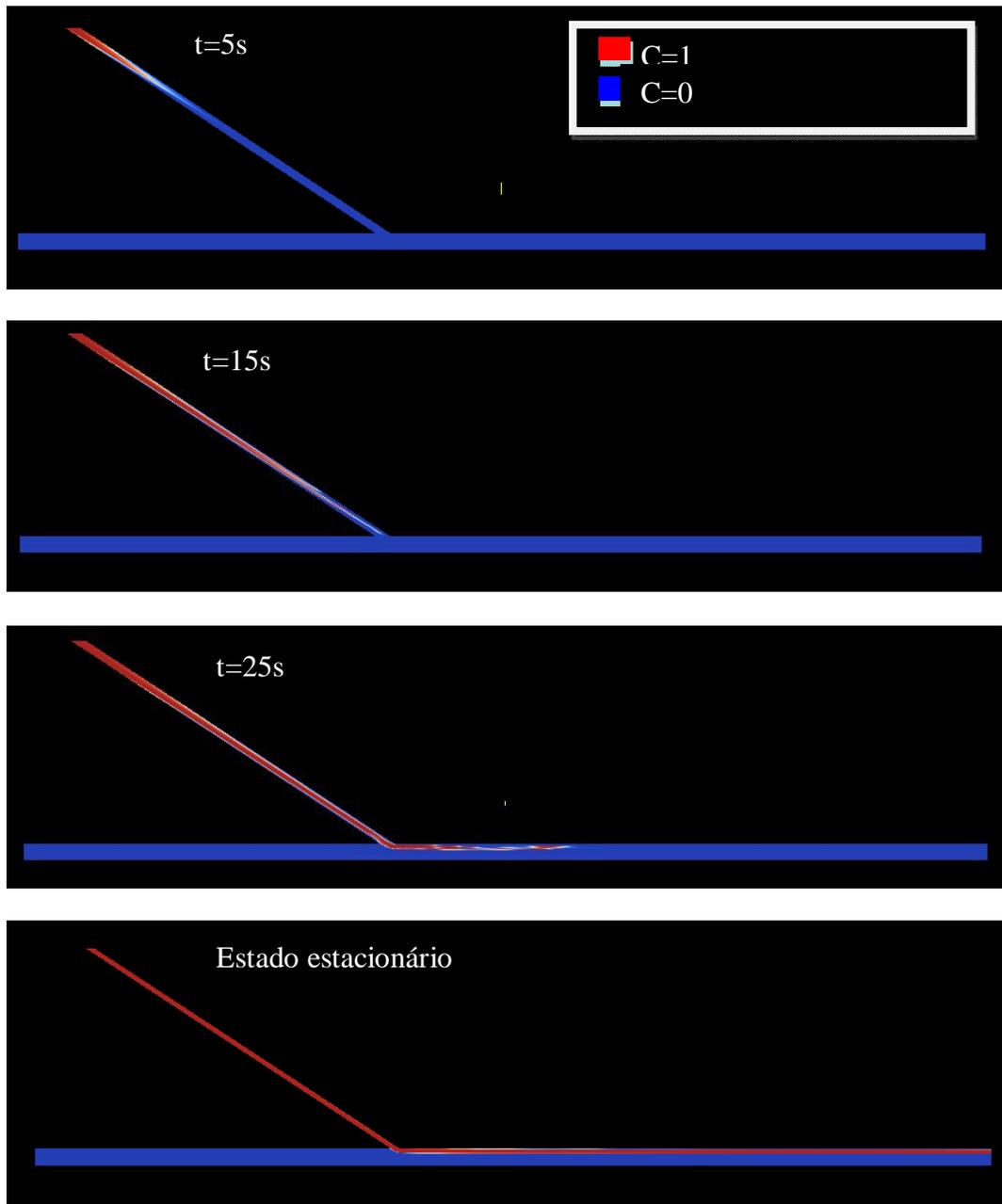


Figura 4-1 : Evolução da distribuição dos fluidos.

para o caso da simulação com a malha A, o valor máximo atingido (0,0021 m/s) é maior que para malha C (0,0017 m/s). Esse resultado também era esperado, pois na entrada foi imposta uma velocidade constante. Na malha C, a espessura da entrada lateral é menor que em A. Consequentemente, a taxa mássica total no canal de escoamento comum também será menor.

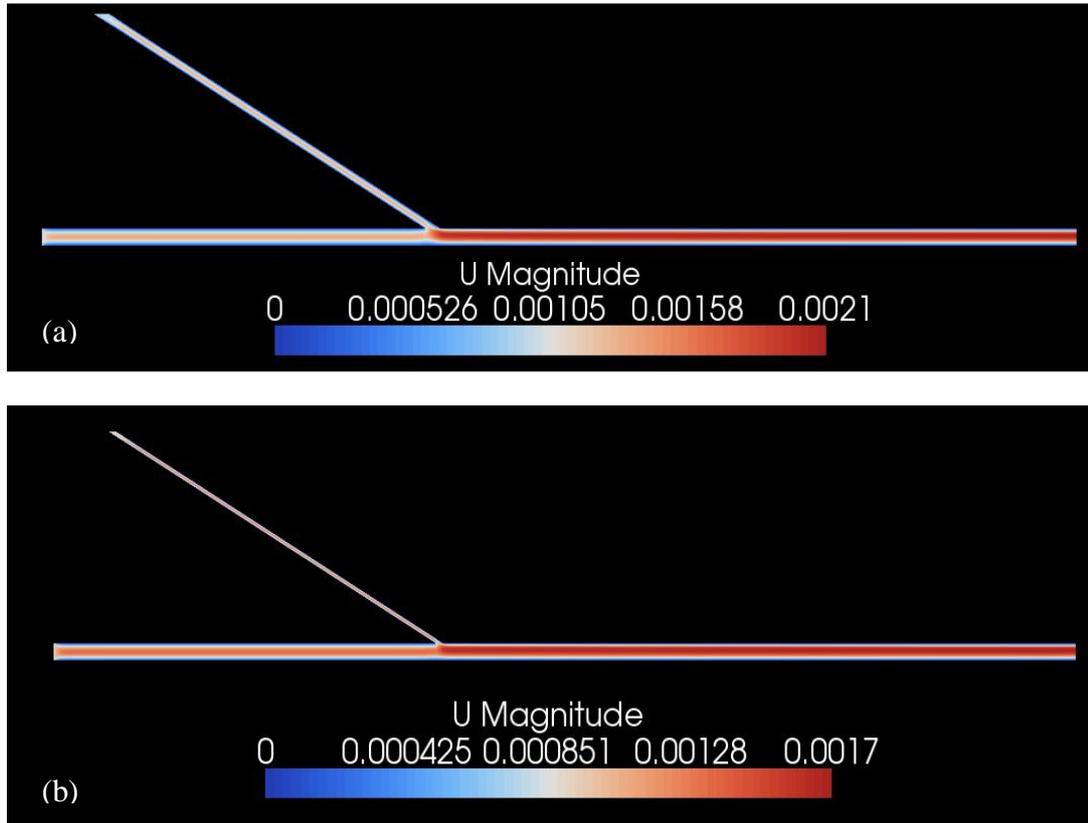


Figura 4-2 : Distribuição de velocidades para simulações: (a) malha A e (b) malha C.

### 4.3: Análise das componentes das tensões

Como observa-se na Figura 4-3, os maiores valores de tensão foram verificadas na zona de confluência, assim como já foi observado por outros autores em experimentos e simulações (MARTYN *et al*, 2009). Além disso, pode-se observar na Figura 4-4 que, na zona anterior à confluência, a componente  $\tau_{xy}$  da tensão apresenta-se aparentemente simétrica, o que está de acordo com a simetria da geometria e a existência de um único fluido nesta parte do canal. Na região do canal após a confluência dos fluidos, a linha de componente  $\tau_{xy}$  nula está levemente deslocada para o interior da região do fluido com menor viscosidade e elasticidade, o que também está correto desde o ponto de vista teórico.

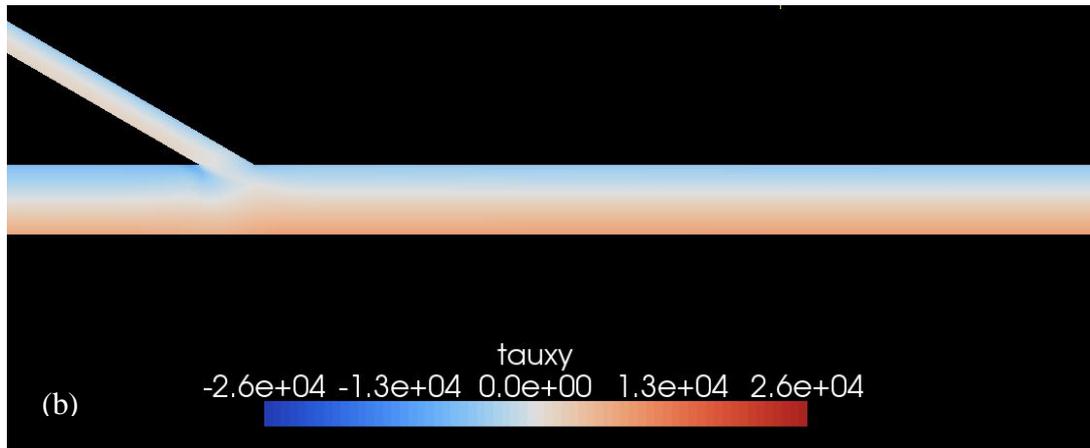
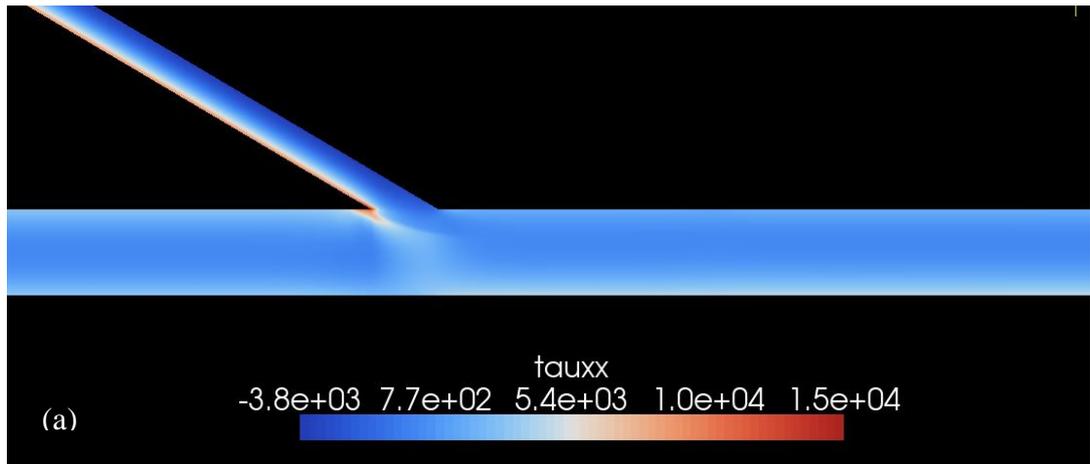


Figura 4-3 : Componentes das tensões (a)  $\tau_{xx}$  e (b)  $\tau_{xy}$  para malha B.

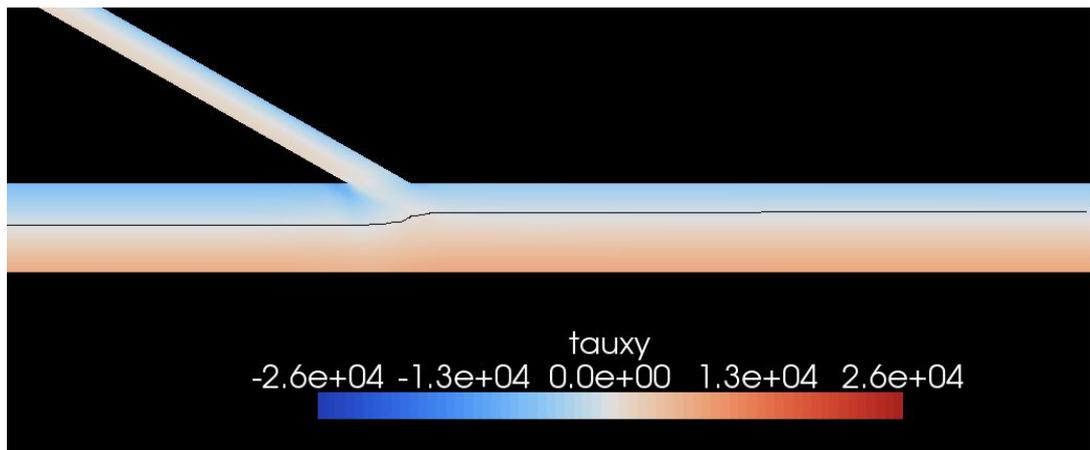


Figura 4-4 : Evolução da componente  $\tau_{xy}$  para malha C.

#### 4.4: Instabilidade interfacial e efeitos ligados à viscoelasticidade

A série de simulações apresentada na Figura 4-5 visava a verificar a capacidade do *solver* e da metodologia empregada para o estudo em reproduzir os fenômenos de instabilidade interfacial na região de contato entre os fluidos e outros fenômenos viscoelásticos previsíveis nesse tipo de escoamento.

A literatura aponta que o aparecimento de instabilidades interfaciais pode ser devido a diferenças nas propriedades reológicas dos materiais co-extrudados (DA SILVA, 2009) ou quando a relação entre as suas espessuras assume um valor crítico (MARTYN *et al*, 2009). Dessa forma, quanto mais os materiais diferem em viscosidade e/ou elasticidade, mais provável é o aparecimento de variações de espessura ao longo do canal. Mas estudos demonstram que mesmo quando os materiais co-extrudados possuem as mesmas propriedades, é possível o aparecimento desse fenômeno. Nas simulações da Figura 4-5, variou-se tanto a espessura das camadas, quanto os parâmetros utilizados nos modelos. Como discutido na Seção 2.2.2, o parâmetro  $\alpha$  do modelo de Giesekus relaciona-se com a grandeza da segunda diferença de tensões normais. Sendo assim, nas simulações (c) e (d) da Figura 4-5, o fluido que entra pelo canal principal, tem uma tensão normal excedente sobre o fluido que entra pela entrada lateral. Além disso, na simulação (d) da mesma figura, as espessuras das camadas são bastante diferentes. Porém, não foi possível, nesses casos, observar nenhuma diferença entre os formatos das linha de interface entre os fluidos. MARTYN *et. al* (2009) realizaram um estudo experimental e computacional no qual evidenciaram o aparecimento de instabilidades interfaciais para co-extrusão de camadas de mesmas propriedades reológicas, para valores de razão entre espessuras da ordem de 0,62, superiores às utilizadas nesse trabalho. Apesar de os trabalhos apresentarem diferenças em relação ao método numérico utilizado e ao ajuste realizado ao modelo, seria de se esperar o aparecimento de alguma alteração no perfil da linha da interface, o que não foi observado. Nesse trabalho foi variada a razão entre as espessuras das camadas até valores mais críticos (0,5). Dessa forma, seria muito importante que se continue a testar a potencialidade desse *software* para esses escoamentos bicamadas nas quais as duas fases são materiais viscoelásticos a fim de se validar essa metodologia. Os estudos realizados até então apenas utilizam esse *solver* para a simulação de escoamentos bifásicos com superfície livre (FAVERO *et al*, 2010). Há a possibilidade de que o método numérico volume de fluido não seja preciso o suficiente para estimar a posição da interface entre as camadas. Esse método não calcula a interface explicitamente, mas a determina como uma propriedade resultante da média da fração de fluido que passa por

aquele volume de controle. Sendo assim, ele consegue apenas estimar uma região provável para interface entre as fases (OpenFoam : The Open Source CFD Toolbox - User Guide, 2008).

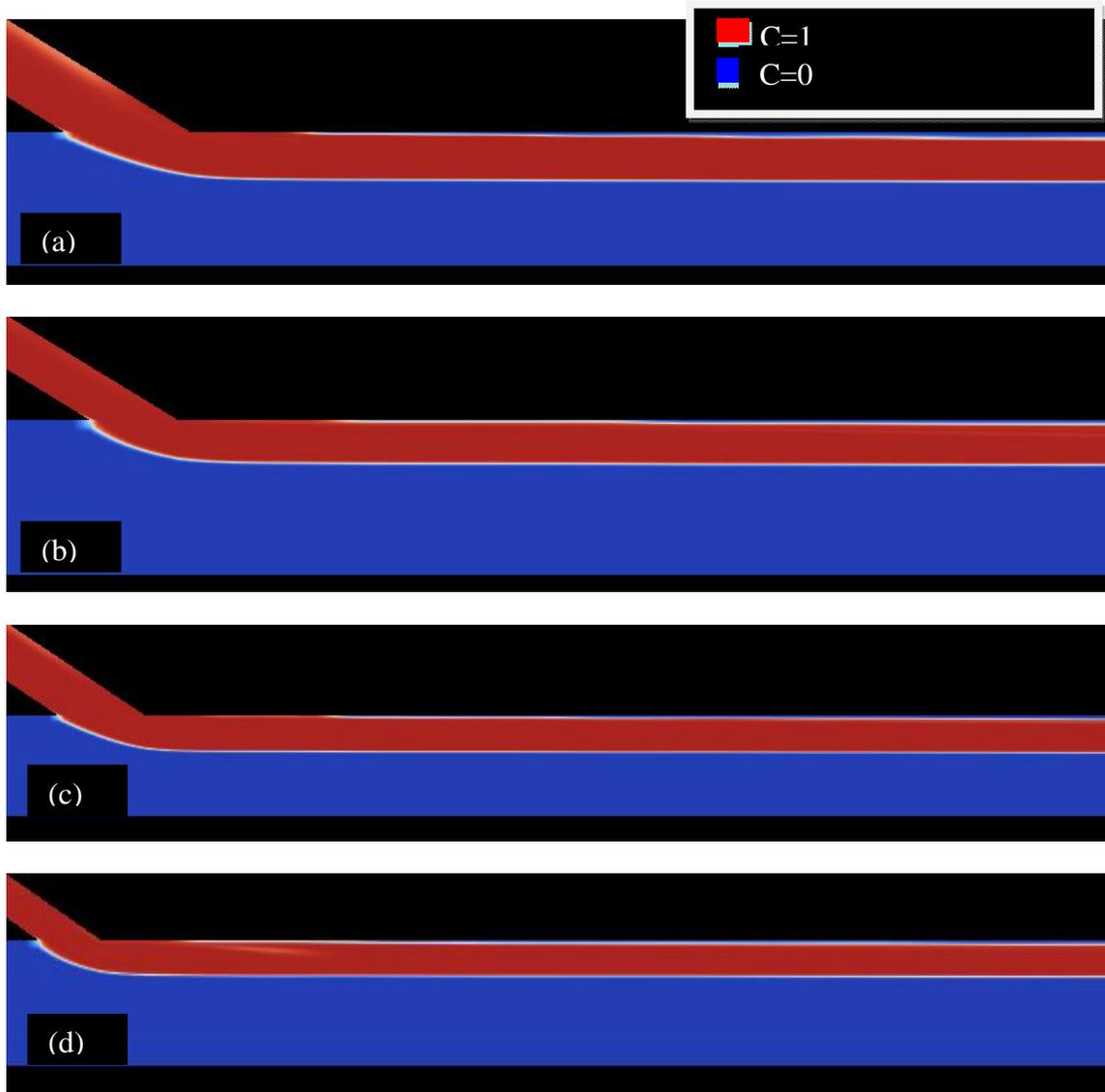


Figura 4-5 : Distribuição dos fluidos para diferentes simulações : (a) malha A, entrada paralela : Dow StyronTM 472 ( $\alpha=0,1$ ), entrada lateral : Dow Styron TM 678E ( $\alpha =0,1$ ) ; (b) malha E, entrada paralela : Dow StyronTM 472 ( $\alpha=0,1$ ), entrada lateral : Dow Styron TM 678E ( $\alpha =0,1$ ) ; (c) malha A, entrada paralela : Dow StyronTM 472 ( $\alpha=0,4$ ), entrada lateral : Dow Styron TM 678E ( $\alpha =0,1$ ) ; (d) malha E, entrada paralela : Dow StyronTM 472 ( $\alpha=0,4$ ), entrada lateral : Dow Styron TM 678E ( $\alpha =0,1$ ).

Analisando as diferenças entre os pares de simulações (a)/(b) e (c)/(d) da Figura 4-5, pode-se observar nas simulações (b) e (d) um aumento da protuberância do fluido de entrada lateral sobre o fluido de entrada paralela na zona de confluência em relação as simulações (a) e (c) respectivamente. Isso se deve ao fato de que a magnitude das tensões às quais o fluido é submetido quando o canal é mais estreito é maior, fazendo com que o fluido tenha uma maior relaxação ao sair do canal, fenômeno esperado para fluidos viscoelásticos (BIRD, ARMSTRONG, & HASSAGER, 1987).

## Capítulo 5: Conclusões e perspectivas

Foi implementada uma metodologia para simulação da co-extrusão com o *solver viscoelasticInterFoam*. Por causa da limitação do tempo desse trabalho, chegou-se a resultados de natureza qualitativa que justificam novos estudos com o aperfeiçoamento dessa metodologia. Conseguiu-se apenas analisar se as simulações realizadas por *viscoelasticInterFoam* resultavam em comportamentos realistas para os materiais, reproduzindo alguns efeitos previsíveis num escoamento de tal tipo.

Também identificou-se uma possível limitação em relação à caracterização da instabilidade interfacial entre as camadas de polímeros co-extrusados, cuja natureza deverá ser analisada mais detalhadamente em novos trabalhos. Essa limitação pode estar relacionada ao grau de refinamento das malhas utilizadas ou pode ser uma limitação intrínseca do método utilizado para a modelagem do sistema bifásico.

As principais sugestões para trabalhos futuros de escoamentos bicamadas de polímeros viscoelásticos no *openFoam* são:

- Aprimorar as condições de contorno aplicadas ao escoamento. Para isso, sugere-se desenvolver uma metodologia no *openFoam* para impor um perfil de velocidades completamente desenvolvido na parede de entrada.
- Prosseguir o estudo da co-extrusão utilizando o modelo PTT para representar o comportamento dos fluidos. A literatura aponta esse modelo como mais fidedigno ao comportamento real de polímeros (OLIVEIRA, 1996). Parâmetros desse modelo estão disponíveis no trabalho de SUNWOO *et al*, 2002.
- Empregar análises quantitativas para verificar a condição da interface, assim como o método da TNSD (*Total Normal Stress Difference*) (MARTYN, 2009; DA SILVA, 2009) ou do DE (*Degree of Encapsulation*) para o caso de escoamentos em tridimensionais (SUNWOO *et al*, 2002).

Por fim, pode-se afirmar que um trabalho completo de obtenção de parâmetros reológicos de polímeros, realização de ensaios experimentais de co-extrusão com esses materiais e uso dos parâmetros obtidos em simulações com o *viscoelasticInterFoam* a fim de validar esse *solver* apresenta um grande interesse científico.

## Bibliografia

- BAAIJENS, J. P. (1994). *Evaluation of constitutive equations for polymer melts and solutions in complex flows*. Tese de Doutorado, Technische Universiteit Eindhoven, Eindhoven.
- BIRD, R. B., ARMSTRONG, R. C., & HASSAGER, O. (1987). *Dynamics of polymeric liquids* (2ªed.). New York: John Wiley & Sons, Inc.
- CERQUEIRA, V., & HEMAIS, C. A. (2001). Estratégia tecnológica e a indústria brasileira. *Polímeros: Ciência e Tecnologia*, 11(3), pp.E7-E10.
- DA SILVA, L. F. (2009). *Desenvolvimento e aplicação de metodologias experimentais e computacionais para auxiliar o estudo de instabilidade interfacial na coextrusão de poliestireno*. Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Engenharia Química, Porto Alegre.
- FAVERO, J. L. (2009). *Simulação de escoamentos viscoelásticos : desenvolvimento de uma metodologia de análise*. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.
- FAVERO, J. L., CARDOZO, N. S., SECCHI, A. R., & JASAK, H. (2010). Simulation of Free Surface Viscoelastic Flow using viscoelasticInterFoam solver. *20th European Symposium on Computer Aided Process Engineering*.
- HEMAIS, C. A. (2003). Polímeros e a indústria automobilística. *Polímeros: Ciência e Tecnologia*, 13(2), pp.107-114.
- HIRT, C., & NICHOLS, B. (1981). Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of Computational Physics* , 39 (1), 201-225.
- JASAK, H. (1996). *Error analysis and estimation for the finite volume method with applications to fluid flow*. Tese de Doutorado, Universidade de Londres, Londres.
- MACOSKO, C. W. (1994). *Rheology : principles, measurements, and applications*. New York: Wiley-VHC, Inc.
- MARTYN, M., SPARES, R., CORTES, P., & ZATLOUKAL, M. (2009). Imaging and analysis of wave type interfacial instability in the coextrusion. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* 156, 150-164.
- MUNIZ, A. R., SECCHI, A. R., & CARDOZO, N. S. (2005). Uma nova metodologia para simulação de escoamentos de fluidos viscoelásticos. *Polímeros : Ciência e Tecnologia* , 15(1), 53-58.

- OLIVEIRA, R. A. (1996). *Simulação de escoamentos multicamadas de polímeros viscoelásticos à base de poli(etileno tereftalato)*. Dissertação de Mestrado, Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química, Campinas.
- OpenFoam : The Open Source CFD Toolbox - User Guide*. (2008).
- PARK, S. J., AHN, K. H., & LEE, S. J. (2001). Numerical simulation of coextrusion process of viscoelastic fluids using the open boundary condition method. *Korea-Australia Rheology Journal*,13(1),37-45.
- SILVA, L. F. (2008). *Desenvolvimento de metodologias para simulação de escoamentos polidispersos usando código livre*. Tese de Doutorado, Universidade Federal do Rio de Janeiro,RiodeJaneiro.
- SUNWOO, K. B., PARK, S. J., LEE, S. J., AHN, K. H., & LEE, S. J. (2000). Three-dimensional numerical simulation of nonisothermal coextrusion process with generalized Newtonian fluids. *Korea-Australia Rheology Journal* , 12 (3/4),165-173.
- SUNWOO, K. B., PARK, S. J., LEE, S. J., AHN, K. H., & LEE, S. J. (2002). Three-dimensional viscoelastic simulation of coextrusion process: comparison with experimental data. *Rheological Acta* , 41, 144-153.